

EFICIENCIA DE COLECCIÓN DE RADIACIÓN UV EN REACTORES FOTOCATALÍTICOS SOLARES. COMPARACIÓN ENTRE UN REACTOR PLANAR Y UN REACTOR TUBULAR CON REFLECTOR PARABÓLICO.

Rodolfo J. Brandi, Orlando M. Alfano and Alberto E. Cassano

INTEC (Universidad Nacional del Litoral - CONICET)

Güemes 3450, 3000 Santa Fe, Argentina - Fax: 54-42-55 91 85 - E-mail: rbrandi@alpha.arcrde.edu.ar

RESUMEN

Las reacciones fotocatalíticas forman parte de las nuevas tecnologías de oxidación avanzadas para la destrucción de contaminantes orgánicos en el agua, utilizando partículas de dióxido de titanio en suspensión y radiación UV. Estos sistemas pueden activarse mediante el uso de radiación solar, ya sea con reactores planares (un sol) o con reactores tubulares con reflectores parabólicos (varios soles). En el presente trabajo se comparan estos dos sistemas de colección en cuanto al aprovechamiento que hacen de la radiación solar. Para tal comparación se calcula la eficiencia de radiación, definida como la relación entre la energía incidente sobre el reactor tubular con reflector parabólico y la energía incidente sobre el reactor planar. Además se define una eficiencia de descomposición de un contaminante. A partir de la evaluación de estas variables, se demuestra que los reactores planares son más eficientes.

INTRODUCCIÓN

Desde 1983 ha sido claramente demostrado que un gran número de contaminantes orgánicos del agua y del aire pueden ser totalmente descompuestos por reacciones fotocatalizadas con dióxido de titanio. Para este tipo de reacciones se utiliza usualmente una suspensión de muy pequeñas partículas de catalizador irradiadas con radiación ultravioleta. La posibilidad del uso de energía solar, aprovechando la región ultravioleta del espectro, es sumamente atractiva desde el punto de vista económico [1,2]. Para aplicaciones prácticas se han propuesto dos tipos de sistemas de colección: los reactores planares (sistemas de un sol) y los reactores tubulares con reflectores parabólicos (sistema de varios soles).

El objetivo de este trabajo es comparar estos dos sistemas de colección, en cuanto al aprovechamiento que hacen de la radiación solar. Para tal comparación se calcula la eficiencia de radiación, definida como la relación entre la energía incidente sobre el reactor tubular con reflector parabólico y la energía incidente sobre el reactor planar. Para ello se lleva a cabo un modelado matemático riguroso de la radiación que llega a la superficie de cada uno de los reactores. Los modelos están basados en las siguientes suposiciones: Los modelos de radiación se realizaron en 2D. Los rayos provenientes del centro del disco solar son perpendiculares tanto a la superficie del reactor planar como al eje focal del reflector parabólico. Se considera que el eje del reactor tubular coincide exactamente con el eje focal del reflector parabólico y que este no tiene imperfecciones en su superficie y produce reflexión especular.

Como criterio de comparación se propone que el área del reactor planar de ancho (W) y largo (L) sea igual al área de abertura del reflector, de abertura (W) y largo (L). Además ambos reactores operan bajo las mismas condiciones (a excepción de los caudales de operación).

MODELO DE RADIACIÓN INCIDENTE SOBRE EL REACTOR PLANAR

Para estudiar la radiación que llega al reactor, se adoptó un modelo de radiación solar que consiste en separarla en dos componentes: una componente directa proveniente del disco solar y una componente difusa que incide sobre la superficie terrestre en forma isotrópica (Fig. 1a).

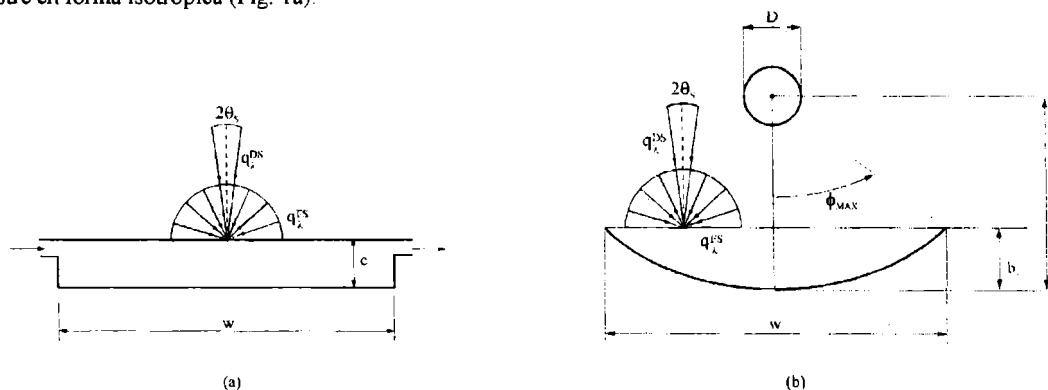


Figura 1. Características Geométricas de los Dos Sistemas de Colección. (a) Reactor Planar y (b) Reactor Tubular.

Para el modelo de la componente directa (DS), se considera que la radiación incide en forma normal a la superficie para cualquier punto sobre esta. La radiación difusa solar (FS) llega a un punto de la superficie del reactor con la misma magnitud desde todas las direcciones.

Podemos ahora, definir una variable κ como la relación de flujos de radiación directa/difusa solar. Esta variable depende del ángulo cenital solar. La porción del espectro solar aprovechada por las reacciones fotocatalíticas se encuentra entre 300-380nm, que es la zona donde absorbe el catalizador. En esta zona del espectro la componente difusa es mayor o del mismo orden que la directa (κ puede variar entre 0.0 y 1.5 como casos límites).

El flujo total neto de radiación incidente (W/cm^2) para cada punto sobre la superficie del reactor planar, es la suma del flujo difuso solar más el flujo directo solar

$$q_{\lambda,Pla}^T = q_{\lambda}^{FS} + q_{\lambda}^{DS} = q_{\lambda}^{FS}(1 + \kappa_{\lambda}) \quad (1)$$

Como este flujo neto es uniforme en toda la superficie (independiente de la posición), la energía radiante incidente por unidad de tiempo (en Watts) es igual al producto del flujo calculado por el área expuesta del reactor.

$$E_{\lambda,Pla}^T = \int_{A_{Pla}} q_{\lambda,Pla}^T dA = W L q_{\lambda}^{FS}(1 + \kappa_{\lambda}) \quad (2)$$

MODELO DE RADIACIÓN INCIDENTE SOBRE EL REACTOR TUBULAR CON REFLECTOR PARABÓLICO

El sistema consiste en un reactor tubular ubicado a lo largo del eje focal de un reflector cilíndrico de sección parabólica. Al sistema llega radiación difusa y directa solar con las mismas consideraciones hechas para el reactor planar, es decir que la radiación incidente sobre el área de abertura del reflector es la misma que la incidente sobre el reactor planar. En la Figura 1b pueden verse las características geométricas y los parámetros utilizados para definir las dimensiones del sistema, tales como: el diámetro del reactor (D), la abertura (W) y el ángulo máximo de abertura del reflector (ϕ_{MAX}). El reflector parabólico genera dos componentes adicionales (las reflejadas), de manera que el modelo considera cuatro tipos de radiación:

- Difusa-Directa (FD)
- Directa-Directa (DD)
- Difusa-Reflejada (FR)
- Directa-Reflejada (DR)

Cada una de estas componentes se modela en 2D, por lo tanto el flujo de radiación es función únicamente de la coordenada cilíndrica angular (β) del reactor. El modelado se realiza utilizando los conceptos de la óptica geométrica. Para la parte reflejada, se tuvo en cuenta que el reactor es opaco a la radiación: esto significa que todo rayo que ingresa a través de su pared es absorbido por el catalizador suspendido.

Para el modelo de la componente FR, como la radiación difusa llega al área de abertura desde todas las direcciones en forma isotrópica y el reflector es especular, se supone que la radiación reflejada es difusa. Considerando el reactor opaco, aparecen dos efectos de recorte. El primero, generado por el hecho que no puede llegar radiación desde direcciones provenientes del interior del reactor. El segundo efecto de recorte surge de descontar todos los rayos que podrían llegar a la posición β en estudio, pero son, antes de ser reflejados, interceptados por el cuerpo del reactor. Existe así un intervalo de direcciones donde los rayos son eclipsados por el reactor

Para el caso de la componente DR, se tiene en cuenta que la radiación directa solar, mediante el uso del reflector parabólico es concentrada. Para el estudio del efecto de concentración pueden definirse algunos parámetros:

- Factor de concentración geométrico: es definido como el cociente entre el área de abertura del reflector (equivalente al área del reactor planar) y el área del reactor tubular [3]:

$$C_A = \frac{A_{Refl}}{A_{Tub}} = \frac{W}{D\pi} \quad (3)$$

- Factor de concentración local: definido como el cociente entre el flujo neto directo reflejado en un punto de la superficie del reactor (sin tener en cuenta la reflectividad del material del reflector Γ_{Refl}) y el flujo neto que llega sobre el reflector (equivalente al flujo directo solar).

$$C(\beta) = \frac{q_{Tub}^{DR}(\beta) / \Gamma_{Refl}}{q^{DS}} \quad (4)$$

- Factor de concentración promedio: es el promedio del factor de concentración local en toda la superficie expuesta del reactor:

$$C = \langle C(\beta) \rangle_{A_{Tub}} = \frac{\langle q_{Tub}^{DR}(\beta) \rangle_{A_{Tub}} / \Gamma_{Refl}}{q^{DS}} \quad (5)$$

Utilizando estas definiciones, el flujo neto de radiación y la energía radiante de la parte Directa Reflejada puede escribirse como:

$$\langle q_{Tub}^{DR}(\beta) \rangle_{A_{Tub}} = (\Gamma_{Refl} C) q^{DS} \quad (6)$$

$$E_{Tub}^{DR} = A_{Tub} \langle q_{Tub}^{DR}(\beta) \rangle_{A_{Tub}} = (\Gamma_{Refl} \frac{C}{C_A}) E_{Pla}^D \quad (7)$$

El flujo total neto de radiación para una determinada posición sobre la superficie del reactor es:

$$q_{\lambda, \text{Tub}}^T(\beta) = q_{\lambda, \text{Tub}}^{\text{DD}}(\beta) + q_{\lambda, \text{Tub}}^{\text{DR}}(\beta) + q_{\lambda, \text{Tub}}^{\text{FD}}(\beta) + q_{\lambda, \text{Tub}}^{\text{FR}}(\beta) \quad (8)$$

Finalmente, la energía radiante incidente por unidad de tiempo se calcula integrando el flujo neto calculado sobre la superficie total del reactor:

$$E_{\lambda, \text{Tub}}^T = D L \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} q_{\lambda, \text{Tub}}^T(\beta) d\beta \quad (9)$$

CALCULO DE LA EFICIENCIA

Podemos definir dos tipos de eficiencias con respecto a la radiación:

- Eficiencia de Flujos: Relación entre flujo de radiación total incidente sobre el reactor tubular y el flujo de radiación solar (que es el mismo que el flujo de radiación incidente sobre el reactor planar):

$$\eta_q = \frac{\langle q_{\text{Tub}}^T(\beta) \rangle_{A_{\text{Tub}}}}{\langle q_{\text{Pla}}^T \rangle_{A_{\text{Pla}}}} = \frac{\left(\langle q_{\text{Tub}}^{\text{DD}}(\beta) \rangle_{A_{\text{Tub}}} + \langle q_{\text{Tub}}^{\text{DR}}(\beta) \rangle_{A_{\text{Tub}}} \right) + \left(\langle q_{\text{Tub}}^{\text{FD}}(\beta) \rangle_{A_{\text{Tub}}} + \langle q_{\text{Tub}}^{\text{FR}}(\beta) \rangle_{A_{\text{Tub}}} \right)}{q^{\text{DS}} + q^{\text{FS}}} \quad (10)$$

-Eficiencia de radiación incidente: relación entre la energía radiante incidente sobre el reactor tubular y la energía incidente sobre el reactor planar:

$$\eta = \frac{E_{\text{Tub}}^T}{E_{\text{Pla}}^T} = \frac{D\pi}{W} \frac{\langle q_{\text{Tub}}^T(\beta) \rangle_{A_{\text{Tub}}}}{\langle q_{\text{Pla}}^T \rangle_{A_{\text{Pla}}}} = \frac{\eta_q}{C_A} = \frac{\kappa \left(\frac{E_{\text{Tub}}^{\text{DD}}}{E_{\text{Pla}}^{\text{D}}} + \Gamma_{\text{Ref}} \frac{C}{C_A} \right) + \left(\frac{E_{\text{Tub}}^{\text{FD}}}{E_{\text{Pla}}^{\text{F}}} + \frac{E_{\text{Tub}}^{\text{FR}}(\Gamma_{\text{Ref}})}{E_{\text{Pla}}^{\text{F}}} \right)}{\kappa + 1} \quad (11)$$

Una aplicación sumamente útil de la eficiencia de radiación es poder predecir la relación entre la velocidad de descomposición de un contaminante en el reactor tubular de volumen V_{Tub} y en el reactor planar de volumen V_{Pla} . Definimos la eficiencia de descomposición del contaminante i :

$$\eta_{d,i} = \frac{\langle R_i \rangle_{V_{\text{Tub}}} V_{\text{Tub}}}{\langle R_i \rangle_{V_{\text{Pla}}} V_{\text{Pla}}} \quad (12)$$

donde R_i representa los moles de i descompuesto / ($\text{cm}^3 \text{ s}$).

Notar que $\eta_{d,i}$ es la relación de moles descompuestos en el reactor tubular frente a los descompuestos en el reactor planar, bajo las mismas condiciones de operación, incluyendo la misma carga de catalizador. Como primer paso, para evaluar esta variable, calculemos la velocidad de absorción de energía (e^a) promediada en el volumen (V_R) de cada reactor, a partir de un balance de energía radiante dentro de cada uno de los reactores:

$$\langle e^a \rangle_{V_R} V_R = E_R^{\text{T,in}} - E_R^{\text{T,out}} \quad (13)$$

Donde el término $E_R^{\text{T,in}}$ es la energía que entra al reactor (calculada con ec. 2 y 9) y el término $E_R^{\text{T,out}}$ correspondiente a la energía que se pierde o se escapa por las paredes del reactor. Suponiendo que el reactor es opaco a la radiación, la energía que se pierde se debe a un fenómeno propio de estos tipos de sistemas: el "back-scattering". Esta energía es sumamente difícil de predecir ya que no es directamente medible experimentalmente y teóricamente requiere la resolución de la ecuación de transferencia radiativa en forma completa y rigurosa. En recientes trabajos publicados [4] se estima que la energía perdida por "scattering" puede alcanzar el 60% de la energía que ingresa al sistema. Entonces, si calculamos esta energía como una porción de la energía entrante, la ecuación 13, toma la forma:

$$\langle e^a \rangle_{V_R} V_R = E_R^{\text{T,in}} - x_R E_R^{\text{T,in}} = \gamma_R E_R^{\text{T,in}} \quad (14)$$

Una expresión comúnmente usada para la velocidad de reacción fotocatalítica promedio en el volumen del reactor ($\langle R_i \rangle$) es el producto de una constante cinética K (dependiente de la carga del catalizador) por el promedio volumétrico de la velocidad de absorción de energía elevada a la potencia n :

$$\langle R_i \rangle_{V_R} = K \langle e^a \rangle_{V_R}^n \quad (15)$$

En el campo de la fotocatalisis se conoce que para sistemas que reciben una moderada o alta irradiación, n es igual a 0.5 y para sistemas que reciben baja irradiación n tiene un valor de 1. Para este último caso la expresión de la eficiencia de descomposición del contaminante i es:

$$\eta_{d,i} = \frac{K \langle e^a \rangle_{V_{\text{Tub}}} V_{\text{Tub}}}{K \langle e^a \rangle_{V_{\text{Pla}}} V_{\text{Pla}}} = \left(\frac{\gamma_{\text{Tub}}}{\gamma_{\text{Pla}}} \right) \left(\frac{E_{\text{Tub}}^{\text{T,in}}}{E_{\text{Pla}}^{\text{T,in}}} \right) = \omega \eta \quad (16)$$

Aquí se ha definido el parámetro ω , como la relación de las fracciones de energía incidente aprovechada para un reactor frente al otro. Esta variable depende de las características geométricas del reactor y las propiedades ópticas del catalizador.

Se puede probar que para la irradiación producida por el sol sobre el reactor planar y más aún en el caso del tubular (varios soles), estamos frente al caso de irradiación moderada o alta, es decir que el orden n es igual a 0.5. Para estos casos necesitamos conocer el promedio volumétrico de la raíz cuadrada de la e^a . Para tal fin es posible suponer un perfil unidimensional del e^a (a lo largo de la coordenada x en el planar y de la coordenada r en el tubular), con una caída exponencial en ambos reactores [4]:

$$e^a(r) \Big|_{\text{Tub}} = e_{w,\text{Tub}}^a \exp[-\zeta(D/2 - r)] \quad e^a(x) \Big|_{\text{Pla}} = e_{w,\text{Pla}}^a \exp(-\zeta x) \quad (17)$$

donde e_w^a es el valor sobre la pared de entrada de radiación al reactor y ζ es un coeficiente de extinción aparente. Esto nos permite calcular el promedio de la raíz, a partir de la raíz del promedio, mediante:

$$\left\langle \sqrt{e^a} \right\rangle_{\text{Pla}} \cong \left[\frac{2}{\sqrt{\zeta c}} \right] \left\langle e^a \right\rangle_{\text{Pla}}^{0.5} \quad \left\langle \sqrt{e^a} \right\rangle_{\text{Tub}} \cong \left[\frac{2\sqrt{2}}{\zeta D} \left(\frac{\zeta D - 4}{\sqrt{\zeta D/2 - 1}} \right) \right] \left\langle e^a \right\rangle_{\text{Tub}}^{0.5} \quad (18)$$

El coeficiente ζ dependerá de la geometría del sistema, del espesor óptico del reactor y de la carga y propiedades ópticas del catalizador. Utilizando un espesor del reactor planar igual al radio del reactor tubular (1cm) y una carga de 1 g/L de dióxido de titanio, se llega a:

$$\eta_{d,j} = \frac{K \left\langle \sqrt{e^a} \right\rangle_{\text{Tub}} V_{\text{Tub}}}{K \left\langle \sqrt{e^a} \right\rangle_{\text{Pla}} V_{\text{Pla}}} = 1.3 \left(\frac{\left\langle e^a \right\rangle_{\text{Tub}}}{\left\langle e^a \right\rangle_{\text{Pla}}} \right)^{0.5} \left(\frac{V_{\text{Tub}}}{V_{\text{Pla}}} \right) = 0.92 \left(\frac{\omega \eta}{C_A} \right)^{0.5} \quad (19)$$

RESULTADOS Y CONCLUSIONES:

En la Figura 2 se muestra la eficiencia de radiación, utilizando como variables κ y C_A^{-1} (para Γ_{Ref} iguales a 0.4 y 0.8). Se observa que la eficiencia del reactor tubular frente al planar no alcanza el 70 %. El hecho que la eficiencia del reactor tubular sea baja se debe a que este sistema aprovecha muy poco la radiación solar difusa (es decir $E_{\text{Tub}}^{\text{FD}}/E_{\text{Pla}}^{\text{F}}$ y $E_{\text{Tub}}^{\text{FR}}/E_{\text{Pla}}^{\text{F}}$ son muy chicos); en cambio, esta componente es utilizada en su totalidad por el reactor planar. En el caso de $\kappa \geq 1$, el efecto de concentración de la radiación directa solar por el reflector, no compensa el desaprovechamiento de la difusa. Se observa además que, a medida que se aumenta κ , la eficiencia del sistema con reflector aumenta ya que la radiación directa, que es justamente la aprovechada por este sistema, adquiere mayor importancia que la difusa. Otra manera de aumentar la eficiencia es aumentar el diámetro del reactor tubular (disminuir C_A); lo que se hace en este caso es aproximar las áreas expuestas de ambos reactores. Esto en la práctica tiene un límite, por las fuertes características de absorción del dióxido de titanio, lo que significaría que una gran parte del volumen del reactor no sea aprovechado por la reacción química.

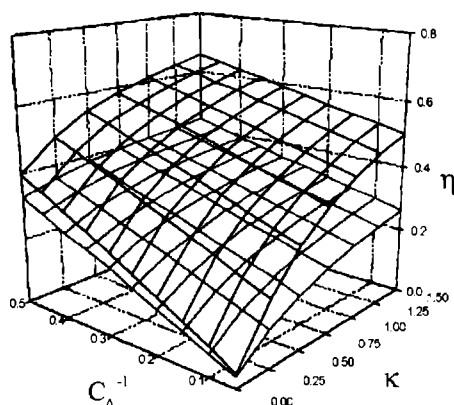


Figura 2. Eficiencia de Radiación. Para $\Gamma_{\text{Ref}}=0.4$ (superficie inferior) y para $\Gamma_{\text{Ref}}=0.8$ (superficie superior)

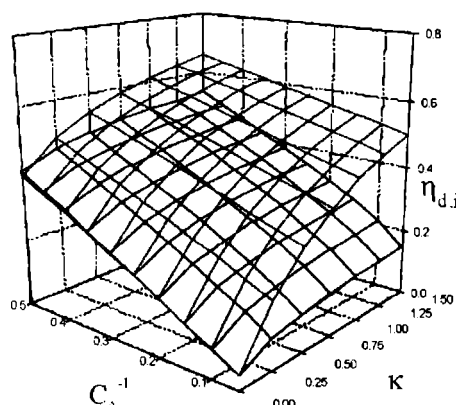


Figura 3. Eficiencia de descomposición de un contaminante para distintos ordenes de reacción. Para $n=0.5$ (sup. inferior) y para $n=1$ (sup. superior)

En la Figura 3 se grafica la eficiencia de descomposición del contaminante en función de κ y C_A^{-1} utilizando el orden de reacción n como parámetro (la figura es para un $\omega=1$ y un $\Gamma_{\text{Ref}}=0.8$). Se puede observar de esta gráfica que la eficiencia de descomposición es también siempre menor que uno. Si estudiamos la influencia del orden de reacción con respecto a la energía radiante absorbida (n), puede verse que para un mismo equipo e igual proporción de radiación directa/difusa, la eficiencia de descomposición es menor para sistemas con moderadas o altas irradiaciones ($n=0.5$) que para un sistema con baja irradiación ($n=1.0$). Queda demostrado así que el reactor planar es más eficiente, no solo en cuanto al aprovechamiento de la radiación solar incidente, sino también en cuanto a la descomposición fotocatalítica de un contaminante.

BIBLIOGRAFÍA

- 1 Ollis D. F. (1991). In *Photochemical Conversion and Storage of Solar Energy*. E. Pelizzetti and M. Schiavello (Editors), Kluwer Ac. Publ. Netherlands, 593
- 2 Bockelmann D., Goslich R., Weichgrebe D. and Bahnemann, D. (1993). In *Photocatalytic Purification and Treatment of Water and Air*. Ollis D. F. and Al-Ekabi H. (Editors). Elsevier. Amsterdam, 771
- 3 Dickinson W. C. and Chremisinoff P. N. (Editors). (1980). *Solar Energy Technology Handbook - Part A Engineering Fundamentals*. M. Dekker, Inc. New York.
- 4 Brandi R. J., Alfano O. M. and Cassano A. E. (1996). *Chem. Eng. Sci.* **51**, 11, 3169